

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Соколова Дениса Николаевича «Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Кристаллизация расплавов и растворов является основой многих технологических процессов получения различных монокристаллов, пленок, нано-материалов и композитов, включая пассивные и активные элементы микроэлектроники, оптоэлектроники и лазерной физики. При этом закономерности начальной нано-стадии этих процессов подчас существенно определяют качество конечного макропродукта. Поэтому как развитие методов моделирования размерных зависимостей структуры и свойств наночастиц, так и дальнейший теоретический анализ процессов их «плавления-кристаллизации» являются по-прежнему весьма актуальными.

На основе разработанных автором основной универсальной компьютерной программы (метод Монте – Карло), и пакета вспомогательных алгоритмов и программ рассмотрен широкий круг научных задач по установлению нано-размерных зависимостей температур «плавления-кристаллизации», соответствующих молярных теплот, удельных теплоемкостей, избыточной поверхностной энергии, структурной эволюции нано-кластеров золота, меди, алюминия и кобальта, а также частично пленок меди и олова, в том числе на углеродной подложке. Проведено дальнейшее сравнение этих результатов с данными предыдущих работ других авторов, полученных компьютерным молекулярно-динамическим методом, теоретическим анализом, и в экспериментальных исследованиях. Достоинством работы является учет модели скин-слоя наночастиц, возможности появления различных структур, включая ГЦК, ГПУ, и икосаэдрической, влияния поверхностных и объемных дефектов наночастиц на их свойства, выявления специфики размерных начальных стадий «плавления-кристаллизации» наночастиц, а также температурные оценки размеров наночастиц при спекании. Выделено 10 пунктов научной новизны работы.

Тем не менее, работа не лишена отдельных редакционных, стилистических и грамматических недостатков, в связи с этим хотелось бы высказать некоторые замечания:

1. В п.1 научной новизны указано, что впервые с использованием метода Монте-Карло обнаружена вторая точка пересечения размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации меди. Однако на рис. 51-54 диссертации видно, что при радиусе частиц 0.7-0.8 нм это странное расчетное пересечение наблюдается только для золота, в то время как для алюминия и кобальта – фактически можно постулировать лишь слияние кривых «плавления и кристаллизации». Такое слияние этих кривых экспериментально выявлено при 0.8-1.0 нм в работах П.М. Валова, В.И. Леймана для наночастиц CuCl (Лейман, В.И. Образование нанофазы и размерные эффекты в свойствах наночастиц в стекле // Автореферат дисс... д.ф.-м.н.- Санкт-Петербург. 2006. – 33 с.). Для меди же обозначена лишь стыковка обеих кривых в двух точках, а отнюдь не их пересечение! При оценке же поведения обеих кривых вблизи температуры плавления макроскопических образцов этих металлов надо сравнивать их с реальными данными по величинам максимальных переохлаждений (ΔT_m) при гомогенной нуклеации, которые достигают ~200-450 К, например, по данным монографии В.П. Скрипова, В.П. Коверды [106]. Отсутствие же заметного переохлаждения четко выявлено только при кристаллизации расплавов цинка (Александров В.Д. Кинетика зародышеобразования и массовой кристаллизации переохлажденных расплавов и аморфных сред / В.Д. Александров. – Донецк: Донбасс, 2011. – 591 с.)
2. Уместно отметить, что в основных результатах и выводах 1-й пункт новизны никак не отражен. Зато пункты 7-8 выводов не достаточной степени конкретизированы.

3. При описании предмета исследования нечетко отмечены управляющие параметры, каковыми являются температура, давление, внешние физические поля, скорость охлаждения, состав среды кристаллизации, размеры нанобъекта, наличие подложки, но отнюдь не форма, дефекты, и полиморфная модификация которые могут изменяться под воздействием вышеуказанных параметров.

Заключение.

Сделанные выше замечания и недочеты не снижают общую положительную оценку работы, выполненную на современном научном уровне и содержащей ряд новых результатов. Диссертация Д.Н. Соколова является вполне завершенной научно-исследовательской работой. Соблюдены необходимые принципы соответствия диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней: соответствие целей и задач исследования; достаточное соответствие автореферата и диссертации; соответствие содержания диссертации и содержания опубликованных работ, а также соответствие темы диссертации и научной специальности. Автореферат и диссертация написаны достаточно понятно, аккуратно оформлены, хорошо иллюстрированы графиками, таблицами, включая полезные цветные рисунки зависимости температуры кристаллизации наночастиц как от их размера, так и от толщины скин-слоя. Результаты диссертационного исследования вполне опубликованы в открытой печати, и включают 42 публикации. Основные научные положения диссертации полностью отражены в 22-ти ведущих рецензируемых научных журналах, внесенных в Перечень журналов и изданий, утвержденных Высшей аттестационной комиссией, и в других изданиях. Впечатляет число опубликованных работ, список конференций, на которых апробирована работа, и детальное изложение научной новизны диссертации.

На основании вышеизложенного считаю, что по актуальности, новизне, достоверности и практической значимости результатов представленная к защите работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Соколов Денис Николаевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

д.ф.-м.н., с.н.с. ФГБУН Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова
Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, ул. ак. Ржанова, 13
тел. (+7383) 333-32-66.
kidyarov@isp.nsc.ru

• Кидяров Борис Иванович

Подпись Б.И. Кидярова заверяю:

Ученый секретарь

ИФП СО РАН

к.ф.-м.н.

17.05.2016

С.А. Аржанникова